```
TITL lach2 in R 3 c
CELL  1.54178  22.3113  22.3113  37.8917   90.000   90.000  120.000
ZERR     6.00   0.0005   0.0005   0.0012    0.000    0.000    0.000
LATT  -3
SYMM  - Y,   X - Y,   Z
SYMM  - X + Y, - X,   Z
SYMM  - X + Y,   Y, 1/2 + Z
SYMM    X,   X - Y, 1/2 + Z
SYMM  - Y, - X, 1/2 + Z
SFAC  C    H    N    O    SI   P    W
UNIT  360  810  18   222  6    18   54
MERG   2
FMAP   2
PLAN   25
SIZE     0.18   0.18   0.18
ACTA
L.S.   4
TEMP    23.00
WGHT    0.046200  592.718201
FVAR       0.03326
C1    1    0.434586    0.519339    0.241671    11.00000    0.07698
0.07544 =
         0.13514   -0.04042    0.03251    0.02745
C2    1    0.494107    0.567170    0.223355    11.00000    0.36724
0.14518 =
         0.31436   -0.01450    0.25295    0.09629
AFIX  33
H2A   2    0.481787    0.590326    0.205907    11.00000   -1.50000
H2B   2    0.514650    0.543351    0.211987    11.00000   -1.50000
H2C   2    0.526627    0.600573    0.239634    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C3    1    0.370813    0.453447    0.226006    11.00000    0.13529
0.25826 =
         0.23668   -0.16128   -0.01281    0.09292
AFIX  33
H3A   2    0.338233    0.428846    0.244498    11.00000   -1.50000
H3B   2    0.385919    0.424020    0.215594    11.00000   -1.50000
H3C   2    0.349144    0.467031    0.208313    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C4    1    0.467002    0.492241    0.263653    11.00000    0.25223
0.25403 =
         0.37291   -0.09847    0.00027    0.21634
AFIX  33
H4A   2    0.433170    0.457828    0.279084    11.00000   -1.50000
H4B   2    0.502428    0.528951    0.277453    11.00000   -1.50000
H4C   2    0.487305    0.471640    0.249273    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C5    1    0.483115    0.449618    0.436369    11.00000    0.14601
0.10037 =
         0.14204    0.02350   -0.01532    0.08690
AFIX  23
H5A   2    0.529822    0.475334    0.445649    11.00000   -1.20000
H5B   2    0.465400    0.401214    0.441982    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C6    1    0.486853    0.457362    0.396008    11.00000    0.14183
0.13223 =
         0.18943    0.00990   -0.01434    0.08284
AFIX  23
H6A   2    0.506008    0.505433    0.389212    11.00000   -1.20000
H6B   2    0.441355    0.430280    0.385494    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C7    1    0.534828    0.429861    0.384704    11.00000    0.20236
0.19940 =
         0.17413   -0.01422    0.00312    0.09781
AFIX  23
H7A   2    0.518262    0.383322    0.393453    11.00000   -1.20000
```

```
H7B   2    0.581768    0.459773    0.392950    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C8    1    0.530672    0.430895    0.344139    11.00000    0.26135
0.13639 =
         0.21542    0.01422    0.00497    0.10828
AFIX  33
H8A   2    0.560309    0.415694    0.334086    11.00000   -1.50000
H8B   2    0.545276    0.477121    0.336320    11.00000   -1.50000
H8C   2    0.483843    0.400513    0.336736    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C9    1    0.363763    0.433085    0.441494    11.00000    0.11769
0.19598 =
         0.11713    0.01867   -0.03306    0.11405
AFIX  23
H9A   2    0.336603    0.451386    0.452035    11.00000   -1.20000
H9B   2    0.364776    0.440388    0.416214    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C10   1    0.327595    0.354848    0.448701    11.00000    0.12283
0.11602 =
         0.17612    0.00350   -0.01024    0.04547
AFIX  23
H10A  2    0.326616    0.346048    0.473823    11.00000   -1.20000
H10B  2    0.351733    0.334512    0.436879    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C11   1    0.253610    0.324156    0.434197    11.00000    0.13820
0.18482 =
         0.21628    0.00506   -0.01713    0.06219
AFIX  23
H11A  2    0.230331    0.346102    0.445303    11.00000   -1.20000
H11B  2    0.254720    0.331506    0.408918    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C12   1    0.215357    0.246282    0.442527    11.00000    0.27874
0.28499 =
         0.33620    0.08788   -0.00229    0.15361
AFIX  33
H12A  2    0.168473    0.225546    0.434295    11.00000   -1.50000
H12B  2    0.215495    0.239697    0.467557    11.00000   -1.50000
H12C  2    0.238220    0.224982    0.430929    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C13   1    0.442193    0.460171    0.493958    11.00000    0.11616
0.08029 =
         0.12722    0.01400   -0.02759    0.06126
AFIX  23
H13A  2    0.490129    0.487120    0.501356    11.00000   -1.20000
H13B  2    0.428357    0.411706    0.496619    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C14   1    0.398079    0.476315    0.519048    11.00000    0.13369
0.10853 =
         0.20613   -0.00758   -0.00131    0.06292
AFIX  23
H14A  2    0.349287    0.448070    0.513467    11.00000   -1.20000
H14B  2    0.411046    0.524721    0.517541    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C15   1    0.413594    0.458880    0.556019    11.00000    0.21608
0.17835 =
         0.23409   -0.04942    0.05077    0.10120
AFIX  23
H15A  2    0.462460    0.486089    0.561652    11.00000   -1.20000
H15B  2    0.398694    0.410076    0.558185    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C16   1    0.370033    0.479003    0.579435    11.00000    0.23697
0.20547 =
         0.25136    0.06203    0.02239    0.04737
AFIX  33
H16A  2    0.374972    0.469836    0.603696    11.00000   -1.50000
H16B  2    0.322251    0.452351    0.572685    11.00000   -1.50000
```

```
H16C  2    0.385711    0.527371    0.576525    11.00000   -1.50000
AFIX   0
C17   1    0.468591    0.550200    0.445166    11.00000    0.12600
0.12275 =
         0.20895    0.03242    0.00289    0.09776
AFIX  23
H17A  2    0.441273    0.567297    0.456713    11.00000   -1.20000
H17B  2    0.461571    0.551350    0.419967    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C18   1    0.545287    0.601980    0.452876    11.00000    0.17642
0.13640 =
         0.17573    0.01730    0.01338    0.09831
AFIX  23
H18A  2    0.571485    0.578344    0.449875    11.00000   -1.20000
H18B  2    0.561858    0.638670    0.435435    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C19   1    0.560768    0.635055    0.489818    11.00000    0.34928
0.26099 =
         0.33357   -0.03149   -0.03023    0.18404
AFIX  23
H19A  2    0.560338    0.603881    0.507789    11.00000   -1.20000
H19B  2    0.528928    0.650896    0.496298    11.00000   -1.20000
AFIX   0
C20   1    0.634512    0.695920    0.482807    11.00000    0.18300
0.12485 =
         0.30106   -0.04819   -0.11513    0.00463
AFIX  33
H20A  2    0.652353    0.722910    0.503924    11.00000   -1.50000
H20B  2    0.632968    0.724510    0.464304    11.00000   -1.50000
H20C  2    0.664031    0.678157    0.475838    11.00000   -1.50000
AFIX   0
N1    3    0.438235    0.474010    0.455829    11.00000    0.08828
0.07871 =
         0.16076    0.02249   -0.03043    0.05465
O1    4    0.291354    0.415310    0.348223    11.00000    0.07242
0.04494 =
         0.10915   -0.00233    0.01351    0.02740
O2    4    0.414803    0.544209    0.352421    11.00000    0.02201
0.03547 =
         0.10489    0.00334    0.00205    0.01761
O3    4    0.363201    0.622836    0.334368    11.00000    0.03345
0.03744 =
         0.06320   -0.00876   -0.00175    0.01742
O4    4    0.230812    0.495588    0.333905    11.00000    0.06498
0.03197 =
         0.05314   -0.01999   -0.00759    0.02407
O5    4    0.337770    0.510212    0.295967    11.00000    0.05061
0.05121 =
         0.17473   -0.03194   -0.03217    0.03158
O6    4    0.369483    0.609375    0.245096    11.00000    0.11766
0.14460 =
         0.10457    0.04885   -0.00330    0.05767
O7    4    0.307950    0.524949    0.389806    11.00000    0.03140
0.02907 =
         0.10461    0.01339    0.00886    0.01427
O8    4    0.333333    0.666667    0.386163    10.33333    0.01607
0.01607 =
         0.12798    0.00000    0.00000    0.00804
O9    4    0.459570    0.660582    0.391089    11.00000    0.02462
0.04068 =
         0.10323    0.02709   -0.00223    0.01507
O10   4    0.254485    0.633201    0.442367    11.00000    0.04060
0.04056 =
         0.09571   -0.00165    0.00638    0.02412
O11   4    0.239512    0.502450    0.454594    11.00000    0.07898
0.06912 =
```

```
         0.05457    0.01488    0.01741    0.04135
O12   4    0.553828    0.644514    0.349523    11.00000    0.03938
0.06048 =
         0.12241    0.00259    0.02350    0.02495
O13   4    0.464958    0.621522    0.296621    11.00000    0.05496
0.04860 =
         0.15932    0.03042    0.03269    0.03389
SI1   5    0.333333    0.666667    0.345453    10.33333    0.02255
0.02255 =
         0.01423    0.00000    0.00000    0.01127
P1    6    0.401424    0.568076    0.268952    11.00000    0.07232
0.07770 =
         0.10286   -0.00465    0.01911    0.03601
W1    7    0.316957    0.501888    0.342883    11.00000    0.04181
0.03130 =
         0.08268   -0.00493    0.00689    0.01953
W2    7    0.275529    0.565694    0.423673    11.00000    0.03902
0.03387 =
         0.06162    0.00674    0.00762    0.01643
W3    7    0.476302    0.640414    0.344201    11.00000    0.03481
0.04274 =
         0.08324    0.00607    0.01116    0.02347
C21   1    0.666667    0.333333    0.294351    10.03333    0.16789
C22   1    0.666667    0.333333    0.256084    10.03333    0.04639
N2    3    0.666667    0.333333    0.326548    10.03333    0.07031
HKLF    4

REM  lach2 in R 3 c
REM R1 =  0.0550 for   5163 Fo > 4sig(Fo)  and  0.0864 for all   6575
data
REM    346 parameters refined using    118 restraints

END

WGHT      0.0461    592.1284
REM Highest difference peak  1.940,  deepest hole -1.944,  1-sigma
level  0.236
Q1    1   0.2682  0.5660  0.4490  11.00000  0.05    1.94
Q2    1   0.2799  0.5490  0.3989  11.00000  0.05    1.60
Q3    1   0.3333  0.6667  0.3175  10.33333  0.05    1.54
Q4    1   0.3230  0.5102  0.3192  11.00000  0.05    1.49
Q5    1   0.4789  0.6483  0.3177  11.00000  0.05    1.46
```